

芯片表面上极性冷分子的静电囚禁

马 慧^{1,2} 许雪艳² 印建平¹

(¹ 华东师范大学物理系精密光谱科学与技术国家重点实验室, 上海 200062)

² 巢湖学院物理系, 安徽 巢湖 238000

摘要 提出了采用芯片表面上方形载荷导线框产生的静电场实现极性冷分子芯片表面囚禁的新方案, 计算了方形载荷导线框周围的电场分布, 分析了囚禁中心位置和导线框几何参数之间的依赖关系, 并研究了过囚禁中心在 x 和 z 方向的电场强度和其对应的 CO 分子的 Stark 囚禁势与几何参数之间的关系。研究表明, 对于 CO 分子, 该方案的有效势阱深度可达 130 mK, 这足以囚禁温度约为 50 mK 处于弱场搜寻态的极性冷分子。显然, 这样的静电表面势阱在分子光学和分子芯片、量子光学、量子计算和量子信息处理等领域中都有重要的应用。

关键词 原子和分子物理学; 静电表面囚禁; 有限元分析; 分子芯片; Maxwell 软件

中图分类号 O561 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS201131.0202001

Electrostatic Trapping of Cold Polar Molecules on a Chip

Ma Hui^{1,2} Xu Xueyan² Yin Jianping

(¹ State Key Laboratory of Precision Spectroscopy, Department of Physics, East China Normal University, Shanghai 200062, China

² Department of Physics, Chaohu College, Chaohu, Anhui 238000, China

Abstract A novel scheme is proposed to realize the electrostatic surface trapping of cold polar molecules on a chip by using a square charged wire. The spatial distribution of the electrostatic field around the square charged wire is calculated. Then the dependent relation between the position of trapping center and the geometric parameters is analyzed. Afterwards, the dependences of the electric field distribution (including the corresponding Stark trapping potential for CO molecules) on the geometric parameters of the square wire is studied in the x and z direction. The study shows that the efficient trapping potential for CO molecules is greater than 130 mK, which is high enough to trap cold polar molecules with a temperature of 50 mK in the weak-field-seeking states. Obviously, the electrostatic surface trapping proposed here has some important applications in the fields of molecular optics and molecular chip, quantum optics, quantum computing and quantum information processing, etc.

Key words atomic and molecular physics; electrostatic surface trapping; finite element analysis; molecule chip; Maxwell software

OCIS codes 020.0020; 270.5585; 230.3120; 260.6580

1 引 言

超冷分子在基本物理问题的研究、基本物理常数的精密测量^[1,2]、高分辨率激光光谱^[3]、冷化学反应和冷分子碰撞研究^[4~6]、物质波的干涉测量^[7]、量子计算和信息处理等方面有着重要的应用^[8,9]。因此,在

冷分子物理和分子光学、冷分子光谱学和精密测量科学、量子光学和量子信息科学等领域,目前越来越多的研究小组开始把冷分子的产生、囚禁与操控及其应用研究作为研究的重要目标之一。

囚禁技术主要包括极性冷分子的激光囚禁、静

收稿日期: 2010-06-28; 收到修改稿日期: 2010-08-08

基金项目: 国家自然科学基金(10174050, 10374029, 10674047)、国家自然科学基金重点项目(10434060)、上海市基础研究重点基金(07JC14017)、安徽省高校优秀青年人才基金(2010SQRL130)和巢湖学院自然科学基金(XLY-200905)资助课题。

作者简介: 马 慧(1981—), 女, 硕士, 实验师, 主要从事分子光学及分子芯片等方面的研究。

E-mail: email-mahui@163.com

导师简介: 印建平(1955—), 男, 博士, 教授, 主要从事原子、分子与量子光学等方面的研究。

E-mail: jpyin@phy.ecnu.edu.cn

磁囚禁、微波囚禁以及静电囚禁等。1998年 Knize 小组^[10]实现了超冷 Cs₂ 分子的激光囚禁；同年 Doyle 小组提出了顺磁分子的静磁囚禁方案^[11]；2004年 DeMille 等^[12]提出了极性冷分子的微波囚禁新方案。特别是在静电囚禁方面，2000年 Meijer 小组^[13]利用一个环形电极和两个帽状电极实现了弱场搜寻态重氮分子的静电囚禁，得到温度低于 350 mK，体积为 0.25 cm³ 和密度为 10⁶ cm⁻³ 的重氮冷分子样品。在 2005 年，他们利用两个环形电极和两个帽状电极实现了强场搜寻态¹⁵ND₃ 分子的静电囚禁，相应的囚禁体积为 20 mm³，阱深为 5 mK^[14]。然而这些囚禁方案都不能实现极性冷分子在芯片表面的静电囚禁，无法构成集成冷分子芯片。为了实现冷分子的表面静电囚禁，2007 年我们小组^[15]提出了利用单个圆形电荷导线实现极性冷分子表面静电囚禁的方案。由于采用 2D 圆形电荷导线阵列构成的 2D 静电晶格不太理想，本文将采用单个方形电荷导线框实现极性冷分子的静电表面囚禁；如果利用微电子制作技术把多个方形电荷导线框按照一定的要求排列组合并集成起来，制作在基底的表面上，还可构成微结构的集成分子光学芯片，为单分子的静电囚禁、集成分子光学与分子芯片的研制和量子计算与量子信息处理等提供了新的实验平台^[16,17]。

2 极性冷分子表面静电囚禁的原理性方案

采用单个方形电荷导线框实现极性冷分子静电

表面囚禁的原理性方案如图 1 所示。在方案中，介质板(即芯片)下表面接地，上表面嵌有一个不锈钢直导线弯曲成的方形导线框，导线框的一半嵌在介质板内。方形导线框的边长为 $2a$ ，截面半径为 r ，所加电压为 U 。介质板厚度为 b ，材料为聚四氟乙烯，它的相对电介质常数 $\epsilon_r = 2.1$ ，绝缘参数为 60 kV/mm。

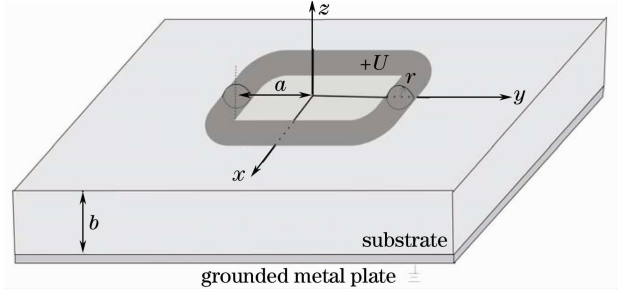


图 1 采用单个方形电荷导线框实现冷分子静电表面囚禁的方案图

Fig. 1 Schematic diagram of molecular surface trapping using an electrostatic field generated by the square charged wire on the insulating substrate

由于考虑到方形电荷导线框有粗细，很难导出该导线框产生的电场分布解析解，所以本文采用有限元软件 Maxwell 计算了电荷导线产生的静电场分布^[18]。以介质板表面作为 $x-y$ 平面，方形线框的中心为坐标原点建立坐标系，得到了 $a = 5$ mm, $b = 5$ mm, $r = 1$ mm, $U = 15$ kV 时, $x-z$ 平面($y = 0$) 和 $x-y$ 平面($z_0 = 1.40$ mm) 的电场等高线分布，如图 2 所示, $x = 0, y = 0, z_0 = 1.40$ mm 是介质板上方电场极小小值的坐标。

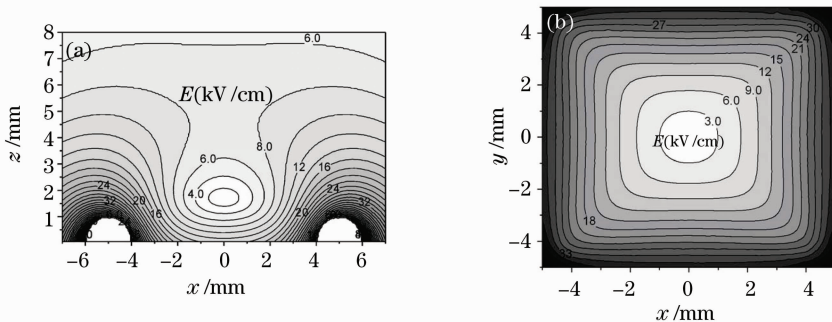


图 2 电场等高线分布。(a) $x-z$ 平面($y=0$), (b) $x-y$ 平面($z_0 = 1.40$ mm)

Fig. 2 Contour distribution of the electric field. (a) in the $x-z$ plane ($y=0$), (b) in the $x-y$ plane ($z_0 = 1.40$ mm)

当一个电偶极矩为 μ 的极性冷分子在非均匀静电场 $E(r)$ 中运动时，由于一阶 Stark 效应，中性分子与静电场间的电偶极相互作用势为 $W_{\text{stark}} = -\mu \cdot E(r)$ ，分子受到的电场偶极力大小为 $F = -\mu \cdot \nabla E$ 。当分子电偶极矩 μ 与电场平行时，处在强场搜寻态

的极性冷分子在电场力的作用下将被吸引到电场最强的地方；而当分子的电偶极矩 μ 与电场反平行时，处在弱场搜寻态的极性冷分子将被排斥到电场最弱的地方^[19]。从图 2 可以看出，方形电荷导线框在介质板上方产生的电场是不均匀的，在 $x=0, y=$

0 和 $z = z_0$ 的位置处存在一个电场极小值, 形成一个 3D 封闭的局域空心静电势阱, 如果将极性冷分子有效装载于该静电表面势阱, 即可实现弱场搜寻态冷分子的静电表面囚禁。

3 数值计算与分析

3.1 囚禁中心和几何参数(a 和 b) 间的关系

为了得到冷分子被囚禁在介质板表面的位置, 从而对冷分子进行操纵和控制。研究了 $U = 15 \text{ kV}$, $r = 1 \text{ mm}$ 时, 囚禁中心位置 $(0, 0, z_0)$ 与方形导线框边长半宽度 a 和介质板厚度 b 之间的关系, 结果如图 3 和图 4 所示。

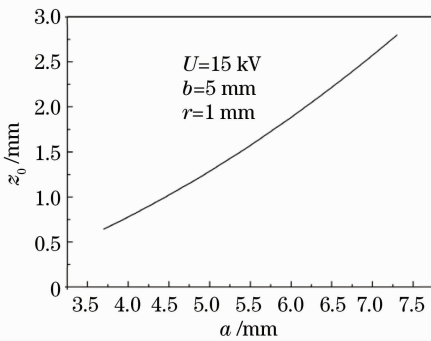


图 3 囚禁中心位置 z_0 与导线边长半宽度 a 之间的关系

Fig. 3 Relation between the position z_0 and the half width of the wire a

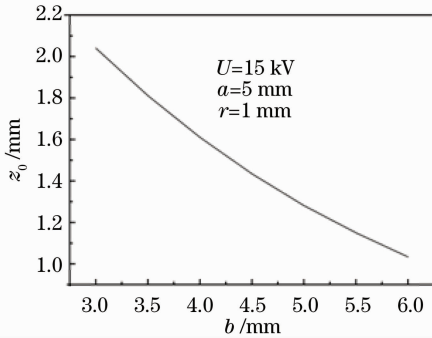


图 4 囚禁中心位置 z_0 与介质板厚度 b 之间的关系

Fig. 4 Relation between the position z_0 of the trapping center and the substrate plate thickness b

从图 3 可清楚地看到: $U = 15 \text{ kV}$, $b = 5 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$ 时, 随着 a 的增加, 囚禁中心位置 z_0 将快速升高。当 a 从 4 mm 增加到 7 mm 时, 囚禁中心的位置从 0.78 mm 抬高到 2.57 mm。从图 4 可以看到, 当 $U = 15 \text{ kV}$, $a = 5 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$ 时, 随着 b 的增加, 囚禁中心位置 z_0 逐渐降低。当 b 从 3 mm 增加到 6 mm 时, 囚禁中心的位置 z_0 将从 2.0 mm 降低到 1.0 mm。该结果表明, 可以通过改变几何参数(a 和 b) 去改变或者控制冷分子在芯片表面的

囚禁位置。

3.2 电场分布与几何参数(a 和 b) 的关系

为了了解势阱深度与几何参数的关系, 计算了 $U = 15 \text{ kV}$, $b = 5 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$, 方形导线框边长半宽度 $a = 4, 5$ 和 7 mm 时, 随着 a 的变化, 过囚禁中心在 x 方向和 z 方向的电场强度 E 分布和相应的 CO 分子 Stark 囚禁势 W 的等效温度分布; 对于处在最低三重态($a^3 \Pi$) 中的 CO 分子, 电偶极矩大小为 $4.562 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}^{[20]}$, 计算结果如图 5 所示。从图 5(a) 看出, 随着 a 的增加, 沿 x 方向, 电场强度 E 和相应的 CO 分子的 Stark 势 W 逐渐降低。当 $U = 15 \text{ kV}$, $b = 5 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$, a 从 4 mm 增加到 7 mm 时, 最大 Stark 囚禁势从 490 mK 降低到约 85 mK。从图 5(b) 看出: z 方向电场分布是不对称的, 在 z 轴正方向存在两个电场最大值和对应的 CO 分子 Stark 囚禁势的最大值, 其中一个在囚禁中心 z_0 的下方(也就是绝缘介质板的表面), 另一个在囚禁中心 z_0 的上方。由于其他方向的最大电场都比 z 方向两个最大电场中相对较小的最大电场大, 所以 z 方向相对较小的最大电场决定静电阱的有效囚禁深度 W_{eff} ; 如果定义相对较小的最大电场为冷分子的有效囚禁电场 E_{eff} , 与之对应的最大 Stark 囚禁势称为有效囚禁深度。当 $U = 15 \text{ kV}$, $b = 5 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$, a 从 4 mm 增加到 7 mm 时, 囚禁中心的位置 z_0 将从 0.78 mm 增加到 2.57 mm; 囚禁中心下方电场梯度逐渐减小, 电场最大值随之增加; 而在囚禁中心上方, 电场梯度逐渐降低, 电场最大值逐渐降低; 随着 a 的增加, 有效囚禁电场 E_{eff} 和有效囚禁势 W_{eff} 先增加后降低。当 $U = 15 \text{ kV}$, $a = 5 \text{ mm}$, $b = 5 \text{ mm}$ 和 $r = 1 \text{ mm}$ 时, 对于 CO 分子, 最大的有效囚禁势约为 133 mK, 这远高于静电 Stark 减速器输出冷分子的温度(约为 10 mK)。

接着计算了 $U = 15 \text{ kV}$, $a = 5 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$, 介质板厚度为 $b = 3, 4$ 和 6 mm 时, 过囚禁中心在 x 方向和 z 方向上的电场分布及相应于 CO 分子的 Stark 囚禁势分布, 分布曲线如图 6 所示。

从图 6(a) 可以看到, 随着 b 的增加, 过囚禁中心在 x 方向位置相同处的电场大小分布几乎没有变化。从图 6(b) 可以看出, 随着 b 的增加, 囚禁中心下方的电场最大值增大, 而囚禁中心上方的电场最大值减小, 有效囚禁电场 E_{eff} 和有效囚禁势 W_{eff} 随着 b 的增加先增加后降低。当 $a = 5 \text{ mm}$, $b = 4 \text{ mm}$, $r = 1 \text{ mm}$, $U = 15 \text{ kV}$ 时, 对于 CO 分子, 最大的有效囚禁势约为 140 mK。

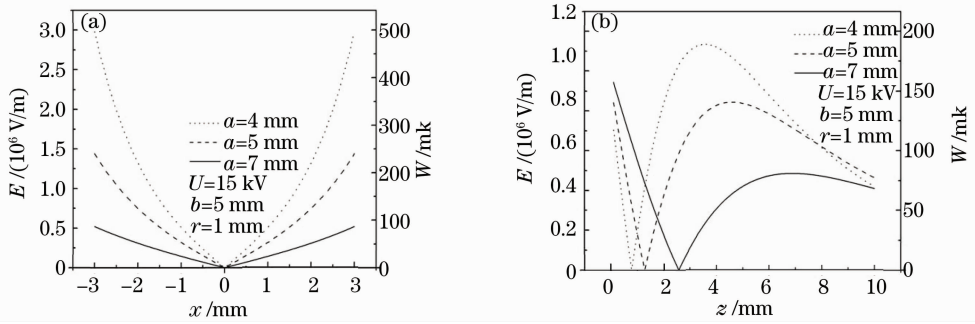


图 5 电场强度和对应的 CO 分子 Stark 势的分布随参数 a 的变化关系。(a) x 方向, (b) z 方向

Fig. 5 Dependences of the spatial distributions of the electric-field intensity and its Stark potential for cold CO molecules on the parameter a . (a) in the x direction, (b) in the z direction

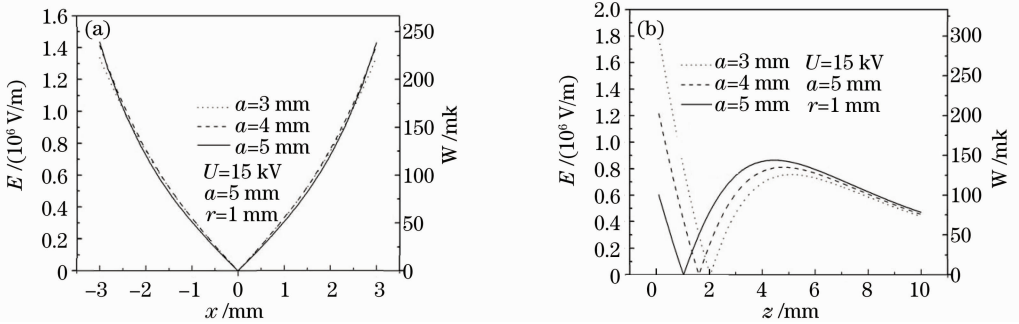


图 6 电场分布和对应的 CO 分子 Stark 势与介质板厚度 b 间的变化关系。(a) x 方向, (b) z 方向

Fig. 6 Dependences of the distributions of the electric field and its Stark potential for cold CO molecules on the thickness of substrate plate b . (a) in the x direction, (b) in the z direction

通过上述分析发现,利用方形载荷导线框可以实现弱场搜寻态分子的有效静电表面囚禁,并且通过改变囚禁方案中的几何参数(a 和 b),即可控制势阱中心的位置;或选择合适的几何参数(a 和 b),同时增加载荷导线的电压,提高有效的势阱深度,从而可实现对囚禁冷分子的有效操纵与控制。

4 结 论

提出了一种采用方形载荷导线框实现极性冷分子静电表面囚禁的新方案,计算了相应的静电场分布及其 CO 分子的 Stark 势,并研究了冷分子囚禁中心位置及势阱深度与导线框几何参数(包括所加电压)间的依赖关系。研究表明,该方案不仅可用于有效囚禁来自 Stark 减速的温度约为 10 mK 的冷分子,或者来自基于静电弯曲导引的低通速度滤波器输出的温度约为 50 mK 的冷分子,甚至用于构建 1D 或 2D 静电晶格。显然,这样的静电表面囚禁方案及其静电晶格在冷分子物理与量子光学、集成分子光学与分子芯片和量子计算与量子信息处理等领域中有着重要的应用。

参 考 文 献

- 1 J. J. Hudson, B. E. Sauer, M. R. Tarbutt *et al.*. Measurement of the electron electric dipole moment using YbF molecules[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **89**(2): 0230031~4
- 2 D. DeMille, F. Bay, S. Bickman *et al.*. Investigation of PbO as a system for measuring the electric dipole moment of the electron [J]. *Phys. Rev. A*, 2000, **61**(5): 0525071~8
- 3 Michael J. Thorpe, Kevin D. Moll, R. Jason Jones *et al.*. Broadband cavity ringdown spectroscopy for sensitive and rapid molecular detection[J]. *Science*, 2006, **311**(5767): 1595~1599
- 4 N. Balakrishnan, A. Dalgarno. Chemistry at ultracold temperatures[J]. *Chem. Phys. Lett.*, 2001, **341**(6): 652~656
- 5 Keith Burnett, Paul S. Julienne, Paul D. Lett *et al.*. Quantum encounters of the cold kind [J]. *Nature*, 2002, **416** (6877): 225~232
- 6 E. Bodo, F. A. Gianturco. F + D2 reaction at ultracold temperatures[J]. *J. Chem. Phys.*, 2002, **116**(22): 9222~9227
- 7 Björn Brezger, Lucia Hackermüller, Stefan Uttenthaler *et al.*. Matter-wave interferometer for large molecules [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **88**(10): 1004041~4
- 8 D. DeMille. Quantum computation with trapped polar molecules [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **88**(6): 0679011~4
- 9 A. André, D. DeMille, J. M. Doyle *et al.*. A coherent all-electrical interface between polar molecules and mesoscopic superconducting resonators [J]. *Nature Physics*, 2006, **2**: 636~642
- 10 T. Takekoshi, B. M. Patterson, R. J. Knize. Observation of optically trapped cold Cesium molecules[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**(23): 5105~5108
- 11 J. D. Weinstein, R. Decarvalho, T. Guillet *et al.*. Magnetic trapping of calcium monohydride molecules at millikelvin

- temperatures[J]. *Nature*, 1998, **395**(6698): 148~150
- 12 D. DeMille, D. R. Glenn, J. Petricka. Microwave traps for cold polar molecules[J]. *Eur. Phys. J. D*, 2004, **31**(2): 375~384
- 13 H. L. Bethlem, G. Berden, F. M. N. Crompvoets *et al.*. Electrostatic trapping of ammonia molecules[J]. *Nature*, 2000, **406**(6795): 491~494
- 14 J. van Veldhoven, H. L. Bethlem, G. Meijer. ac Electric trap for ground-state molecules[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **94**(8): 083001~3
- 15 Ma Hui, Zhou bei, Liao Bin *et al.*. Electrostatic surface trap for cold molecules with a charged circular wire[J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2007, **24**(5): 1228~1230
- 16 Lu Junfa, Ji Xianming, Zhou Qi *et al.*. A novel controllable four-well optical trap for cold atoms or molecules and its two-dimensional optical lattices[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(2): 211~218
陆俊发, 纪宪明, 周 琦 等. 一种新颖的实现冷原子或冷分子囚禁的可控制光学四阱及其二维光学晶格[J]. *光学学报*, 2008, **28**(2): 211~218
- 17 Mu Renwang, Ji Xianming, Yin Jianping. Double-layer optical-trap arrays for trapping cold atom or molecules[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(3): 822~826
沐仁旺, 纪宪明, 印建平. 实现冷原子或冷分子囚禁的双层光阱阵列[J]. *光学学报*, 2009, **29**(3): 822~826
- 18 Liu Guoqiang, Zhao Llingzhi, Jiang Jiya. Ansoft Finite Element Analysis of Electromagnetic Fields [M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005
刘国强, 赵凌志, 蒋继娅. Ansoft 工程电磁场有限元分析[M]. 北京: 电子工业出版社, 2005
- 19 Yong Xia, Lianzhong Deng, Jinming Liu *et al.*. Electrostatic guiding of cold polar molecules with double charged wires[J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2005, **3**(11): 625~628
- 20 Rienk T. Jongma, Gert von Helden, Giel Berden *et al.*. Confining CO molecules in stable orbits[J]. *Chem. Phys. Lett.*, 1997, **207**(3): 304~308